量子力学 I

2024 年 2 月 1 日　田崎晴明

答だけではなく考え方や計算の筋道を簡潔に書け（単純な計算問題は答だけでよい）。**第 n 問の解答は n 枚目の解答用紙に書く**こと（ここで、$n = 1, 2, 3, 4$）。解答用紙の裏面も使用してもよい（解答用紙のスペースが不足する場合には追加の用紙を渡す。一枚の用紙に複数の問題の解答を書かないこと）。試験後、答案を受け取りにくること。2024 年 9 月を過ぎたら答案を予告なく処分する。
問題用紙は 2 枚あり、問題は第 4 問まである。

1.　L を正の定数とする。$0 \le x \le 2L,\ 0 \le y \le L$ で指定される辺が $2L$ と L の長方形状の領域に閉じ込められた質量 m の自由粒子の定常状態（エネルギー固有状態）のシュレディガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right\}\varphi(x,y) = E\,\varphi(x,y) \tag{1}$$

を考える。ただし、$0 \le x \le 2L,\ 0 \le y \le L$ であり、x 方向、y 方向ともに**周期境界条件**をとる。なお、異なった境界条件や正方形状の領域の場合の答えを書いた答案には得点を与えない。

(a) シュレディンガー方程式 (1) の解（つまり、エネルギー固有値とエネルギー固有状態）をすべて求めよ。エネルギー固有状態は規格化せよ。
導出は簡略でよい。最終的な解答をまとめて書くこと。その際、自分で導入した変数（例えば、$n_{\mathrm{x}}, n_{\mathrm{y}}$）の範囲を必ず明示すること。

エネルギー固有値を低い方から順に E_{GS}, E_{1st}, E_{2nd}, E_{3rd} とする。（これらは全て異なった値をとることに注意。）

(b) E_{GS}, E_{1st}, E_{2nd}, E_{3rd} を求め、それぞれの縮退度（エネルギー固有値に対応する独立なエネルギー固有状態の個数）を求めよ。

2.　a を正の定数として区間 $[-a,a]$ における質量 m の自由粒子のシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x)=E\varphi(x) \tag{2}$$

を考える。ただし $\varphi(x)$ は普通とは異なる「周期境界条件」

$$\varphi(a)=\varphi(-a) \tag{3}$$

を満たすとする（普通の周期境界条件ならば導関数についても条件がつく）。

(a) 任意の $E>0$ について、シュレディンガー方程式 (2) と境界条件 (3) を満たす $\varphi(x)$ が存在することを示せ。つまり、この境界条件だと「エネルギー固有値」は「とびとび」にならない。
実定数 k について $\varphi(x)=\cos(kx)$ という波動関数を考えるといい。

(b) さらに、任意の $E<0$ について、シュレディンガー方程式 (2) と境界条件 (3) を満たす $\varphi(x)$ が存在することを示せ。つまり「エネルギー固有値」はいくらでも小さくなってしまう。これは物理的にはかなり困ったことだ。

(c) シュレディンガー方程式 (2) と境界条件 (3) から決まるエネルギー固有値 E は実数だといえるだろうか？　いえるなら証明し、いえないなら E が複素数になる具体例をあげよ。

3. 1次元の区間 $[-a, a]$ 上の質量 m の粒子の定常状態（エネルギー固有状態）のシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + v_0\,\delta(x)\,\varphi(x) = E\,\varphi(x) \tag{4}$$

を考える。a は正の定数、$v_0 \neq 0$ は実定数である。波動関数は周期境界条件

$$\varphi(-a) = \varphi(a), \quad \varphi'(-a) = \varphi'(a) \tag{5}$$

を満たすとする。また、(4) の解が $x = 0$ での接続条件

$$\varphi'(+0) - \varphi'(-0) = \frac{2mv_0}{\hbar^2}\varphi(0) \tag{6}$$

を満たすことを導出抜きで用いてよい。

いつものように、$x \neq 0$ での波動関数の形を決めた上で、境界条件および $x = 0$ での接続条件（講義をきちんと復習すること）を用いて解を決定する。その際、$x \to -x$ の変換について対称なエネルギー固有状態と反対称なエネルギー固有状態を別個に求めるのがいい。

反対称なエネルギー固有状態の扱いは簡単。これから決める波数 $k > 0$ によって波動関数を

$$\varphi(x) = \sin(kx) \tag{7}$$

としよう。

(a) (7) の波動関数は $x = 0$ での接続条件を自動的に満たすことを確認せよ。

(b) (7) の波動関数が境界条件 (5) を満たすことから k を求めよ。

(c) エネルギー固有状態 (7) のエネルギー固有値を k を用いて表せ。

対称なエネルギー固有状態については少し考える必要がある。

(d) 対称な波動関数（つまり偶関数）は必ず $\varphi(-a) = \varphi(a)$ および $\varphi'(-a) = -\varphi'(a)$ を満たすことを示せ。よって、対称な波動関数が周期境界条件 (5) を満たすための必要十分条件は $\varphi'(-a) = \varphi'(a) = 0$ である。

(e) $\varphi'(-a) = 0$ に注意して $-a \le x \le 0$ の範囲での波動関数の候補をコサインを使って（サインを使わず）書け。これから決める波数 $k > 0$ を用いること。

(f) $0 \le x \le a$ の範囲での波動関数を書き、k を決めるための条件を tan を用いて表せ。

(g) k を決めるためのグラフを描け。

(h) 対称な波動関数に対応する最小のエネルギー固有値が取りうる範囲を v_0 が正の場合と負の場合それぞれについて求めよ。

4. 1 次元の 1 粒子の量子力学系を考え、$\hat{x}$, $\hat{p}$ をそれぞれ位置と運動量の演算子とする。講義でみたように

$$\hat{a} := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\ \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\ \hat{p}, \quad \hat{a}^\dagger := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\ \hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\ \hat{p} \tag{8}$$

と定義すると、調和振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \tag{9}$$

と書ける（$m > 0$ は粒子の質量、$\omega > 0$ は振動子の角振動数）。

(a) 交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ を示せ。ただし、$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を証明抜きで使ってよい。

$|\varphi_0\rangle$ を、$\hat{a}|\varphi_0\rangle = 0$ と $\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$ を満たす状態とし、$|\varphi_1\rangle := \hat{a}^\dagger|\varphi_0\rangle$ という状態を定義する。（このとき $\langle\varphi_1| = \langle\varphi_0|\hat{a}$ である。）

(b) $|\varphi_0\rangle, |\varphi_1\rangle$ は $\hat{H}$ の固有状態であることを示し、それぞれの固有値（つまり、固有エネルギー）を求めよ。$|\varphi_1\rangle$ が規格化されていることを示せ。

(c) $\langle\varphi_0|\hat{x}|\varphi_0\rangle$, $\langle\varphi_1|\hat{x}|\varphi_1\rangle$、$\langle\varphi_0|\hat{x}^2|\varphi_0\rangle$, $\langle\varphi_1|\hat{x}^2|\varphi_1\rangle$, を求めよ。